

СИНТЕЗ 7-АМИНО- И 7-ГИДРОКСИ- 4-МЕТИЛХИНОЛИН-2-КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

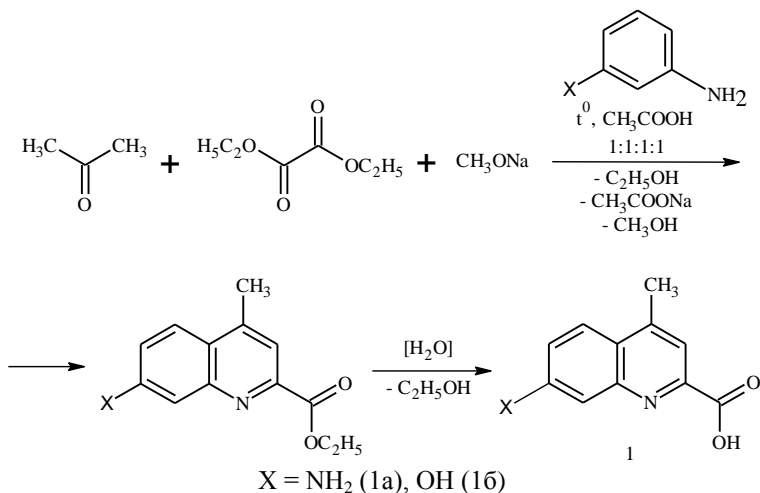
Жданова А.В., Кунавина Е.А., Козьминых В.О.

Оренбургский государственный университет

460018, г. Оренбург, пр. Победы, д. 13

Разработка новых высокоэффективных биологически активных веществ вызывает неослабевающий интерес [1,2]. Известно достаточно большое количество разнообразных лекарственных препаратов, в молекулах которых присутствуют азотистые гетероциклы и, в частности, гетероциклические системы хинолина, хинолинкарбоновых кислот и их производных.

Нами были синтезированы 7-амино-4-метилхинолин-2-карбоновая кислота (1а) и 7-гидрокси-4-метилхинолин-2-карбоновая кислота (1б) предварительной модификацией применяемой ранее методики [3]. В основе синтеза лежит конденсация Клайзена эквимольных количеств ацетона и диэтилоксалата в присутствии основания с дальнейшим нуклеофильным присоединением *м*-фенилендиамина и *м*-аминофенола к промежуточно образующемуся дикетозэфир.



Гетероциклизация ацетона, диэтилоксалата и N-нуклеофильных реагентов в синтезе 7-замещенных 4-метилхинолин-2-карбоновых кислот

Структура соединений установлена на основании данных ИК-спектроскопии, спектроскопии ЯМР ¹H и масс-спектрометрии.

В рамках данного направления перспективным представляется расширение рядов производных хинолин-2-карбоновых кислот за счет варьирования используемых нуклеофильных реагентов и исходных метилкетонов, а также изучение биологической активности целевых продуктов.

1. Земцова М.Н. Синтез и противовирусная активность некоторых производных хинолинового ряда // Химико-фармацевтический журнал. 2011. Т. 45, № 5. С. 9–11.

2. Дубровин А.Н. и др. Поиск биологически активных веществ среди 2-замещенных хинолин-4-карбоновых кислот // Теоретические и прикладные аспекты современной науки. Белгород : ИП Петрова, 2014. Ч. 2. С. 37–39.

3. Козьминых В.О., Кириллова Е.А., Гончаров В.И. и др. Трехкомпонентная тандемная гетероциклизация ацетофенона с диэтилоксалатом и *m*-аминофенолом – новый метод получения 7-гидрокси-4-фенилхинолин-2-карбоновой кислоты // Вестник Оренбургского гос. университета. 2008. № 4(85). С 101–107.

НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ АПИГЕНИНА

*Жуматаева А.Р.⁽¹⁾, Жанымханова П.Ж.⁽¹⁾, Абуляисова Л.К.⁽²⁾,
Мукушева Г.К.⁽¹⁾, Адекенов С.М.⁽¹⁾*

⁽¹⁾ АО Международный научно-производственный холдинг
«Фитохимия»

100009, г. Караганда, ул. М. Газалиева, д. 4

⁽²⁾ Карагандинский государственный университет
100028, г. Караганда, ул. Университетская, д. 28

Апигенин относится к классу полифенольных соединений и входит в группу флавоноидов. Это соединение широко применяется в медицине и обладает рядом фармакологических свойств – спазмолитическим, противовоспалительным, антиоксидантным, а также противораковым действием. Поэтому актуальным является синтез биологически активных соединений на основе флавоноида апигенина. В связи с этим для изучения реакционной способности апигенина нами проведены квантово-химические расчеты методом Хартри-Фока в базисе 6-31G(d) с помощью программы Gaussian.

Рассчитанные энергетические характеристики молекулы апигенина представлены в таблице.